代数方程式を解く総合的なプログラム・パッケージについて (数値計算のアルゴリズムの研究)

AUTHOR(S):

松村, 重宏

CITATION:

松村, 重宏. 代数方程式を解く総合的なプログラム・パッケージについて (数値計算のアルゴリズムの研究). 数理解析研究所講究録 1980, 382: 135-165

ISSUE DATE:

1980-04

URL:

http://hdl.handle.net/2433/104829

数理解析研究所講究録
382巻 1980年 135-165

代数方程式を解く総合的なプログラム・パッケージについて。

早大・理工　松村　重宏

1。はじめに

現在，何らかの計算システムを有する計算センターには，サブルーチン・ライブラリーまたはパッケージと呼ばれているものが用意されている。しかし，その多くは，単体で用いられるサブルーチンの集合体であり，パッケージ全体でひとつの，あるシステムを組織するものではない。この報告の目的は，サブルーチン・パッケージを，単なるプログラムの集合体にとどまらせることなく，代数方程式を解くことに関するプログラムを有機的に組み立て，代数方程式のすべての根を求める総合的なプログラム・パッケージを紹介するところにある。

2。設計方針

このパッケージはROOTS-PACKと呼び，Bairstow-Hitchcock法に関する一連の数値実験により得られた結果を参考にして作成した。ROOTS-PACKは，サブルーチンを単体で使用で

きるという従来のパッケージの機能に加え，

1.使用法が解法に依存しない

2.信頼度の高い解を与え，同時にその評価をする。

ということを作成の目標においた。本来，パッケージは，入出力は，できるだけ簡素化するべきものである。しかし，その与える解は信頼のおけるものでなければならない。

ROOTS-PACKのプログラム本体は，7のFORTRAN Ⅳ言語と，3つのIBM System/370アセンブラ言語で書かれており，FORTRANプログラムから，CALL文によって制御の受け渡しをすることができる。ROOTS-PACKで採用している，あるサブルーチンでは，係数配列，解の入る配列以外にも，計算のための配列を必要とするものがある。FORTRANでは，整合寸法機能と呼ばれるものがついているが，これは単に，配列の重ねあわせの機能に過ぎない。知っての通り，FORTRANの記憶域はすべてSTATICであるため，計算用の配列を別に必要とするサブルーチンを使用する場合，ユーザーは，あらかじめ配列を用意しておかなければならない。ROOTS-PACKでは，仮想主記憶の制御を行ない，自動的に記憶域の割りあて，並びに開放を行なうため，メイン・エントリーより制御の受け渡しをするかぎり，CALLするプログラムで，それらを特別に用意する必要はない。FORTRANよりこのパッケージを使用するに

は，

CALL ROTPAC(N,A,X,R)

N:方程式の次数

A:係数配列

X:解の入る配列

R:評価値の入る配列

と書きさえすればよい。ただし，ROTPAC(ROOTS-PACKのメインエントリー)を引用する前に，引数の型宣言をしておかなければならないのは言うまでもない。

3.解法

3.1 Bairstow-Hitchcock法に関する考察

Bairstow-Hitchcock法(以下B-H法と略す。)は，多項式

$$P(x) = x^n + a_1 x^{n-1} + \cdots + a_n$$

を2次式 x^2+px+q で整除して，次のようにおく。

$$P(x) = (x^2+px+q)(x^{n-2} + b_1 x^{n-3} + \cdots + b_{n-2}) + b_{n-1}(x+p) + b_n$$

b_{n-1}, b_n はともに p, q の関数で，

$$b_{n-1}(p,q) = 0.0$$

$$b_n(p,q) = 0.0$$

を満たす p, q の値を2変数Newton法により求めようとするものである。実係数代数方程式の根を求める問題に対して，

B-H法は，実数で反復内のすべての計算を行なうことができ，しかも収束次数も2次であるため，有効な方法であると考えられる。しかし，p, qの初期値の設定が悪い時などは収束しないと思われがちであった。しかし，B-H法が収束しない原因は別の所にある。

・方程式を解く前に．

B-H法は
$$\begin{cases} p_{i+1} = p_i + \Delta p_i \\ q_{i+1} = q_i + \Delta q_i \end{cases}$$
により順次p, qの値を修正し　$\max(|\Delta p|, |\Delta q|) \leqq \varepsilon$　によって収束判定をする。少し極端な例を考えてみよう。求めるべき根のオーダーが10^{15}といった方程式に対し，倍精度（10進16桁）の演算を行ない，収束判定の定数$\varepsilon = 10^{-15}$と設定したとしよう。従来の考え方ならば，初期値の設定さえ良ければ収束するはずである。しかし，実際の計算では，桁の制限や丸め誤差の限界があり，このような根をもつ方程式に対しても運よく収束判定条件を満たす場合もあるだろうが，多くの場合それは望めない。また，それは無駄である。例えば，仮数部が16桁の浮動小数点演算で実行する場合，根xの指数部を$E(x)$で示すとすると，計算結果の丸め誤差は$0.5 \times 10^{E(x)-16}$で表わされる。つまり，これより厳しい収束判定条件を設けても意味がない訳である。反対に求めるべき根のオーダーが10^{-20}といっ

ような極端に小さい問題に対し，前と同じように $\varepsilon=10^{-15}$ と設定し，収束判定を行なえば，本来は根としてはならないような数値であっても，収束判定をパスしてしまう恐れもある。このようなニセの根により，順次次数低下を行なってゆけば，最終的に得られる数値は本来の根とは似ても似つかぬものとなってしまう。形のうえでは収束した状態ではあるが，得られた解の信頼度はゼロである。収束性に関する話は多く耳にするが，収束判定に関する話はそれほど多くない。しかし，当然のことであるが，それはある場面に於いては，収束に関して，あるいは解の信頼性に関して非常に重要な要素となる。反復の停止条件は，方程式あるいは根に対して何らかの意味を持つものでなければならない。むやみに厳し過ぎても良くないし，またゆるすぎても良くない。そう言う意味で，停止条件としては相対誤差評価を用いるのが良い。ROOTS-PACKに用いたB-H法では，

$$\max(|\Delta p|,|\Delta q|)\leq \max(|p|,|q|)\times 10^{-12}$$

を停止条件とした。

しかし，実際問題として，これだけでは不十分である。と，言うのは，前述した極端な問題では，オーバーフロー・エラーまたはアンダーフロー・エラーを起こすことが考えられるからである。そのような事態の起こることが予想される問題では，

係数変換（スケーリング）を行なうべきであろう。与えられた多項式の係数を $x=ky$ とおいて変換する。k の値は，計算機の内部表示のことを考えれば，$k=16$ 又は $k=16^{-1}$ と定めるのがよい。この変換により，変換後の係数は $f_m = k^m a_m \ (m=1,\cdots,n)$ となる。強力な解法を研究するのも，数値計算の一つの方向であるが，解く以前の環境の整備も重要であろう。

・収束しない問題.

B-H法が収束しない原因は，p,q の初期値の与え方に依存するものではないようである。根の状態と収束の状態を比べてみると，複素平面内に，絶対値が0に近い順に実根，実根…と存在する時は例外なく収束する。収束しない問題は，根の状態が，実根，虚根，… となっているものである。すべてが収束しない訳ではないが，収束しない問題はすべてこのタイプのようである。このような収束しない方程式に対して反復ごとの p,q の値の変化の状態をみると，振動している。ただ振動といっても，単一振動ではなく，1変数Newton法の谷越えの時起こる振動によく似ている。また，おもしろいことに，この振動状態で，適当な p,q の値を引用し，それらを係数とする2次方程式 $x^2+px+q=0.0$ を解いてやると，原点に近い1実根と，虚根の実部に値が似ている実根が得られる。

・収束改善策

B-H法において，収束しない状態となるのは，根のペアの組み方が問題である。上の述べた例の他に，根のオーダーが極端に違うようなものに対しても，収束しないということは十分考えられることである。実験では，収束しなかった方程式に対して，0(原点)を根として方程式に付加して，次数を1つあげてB-H法を適用したところ，収束しなかったものが，見事に収束した。次ページの問題は収束しなかったものの一つである。一番初めの根が分離できない状態である。その時のp, q, ε等の値も出力してみた。ε=EPSILON，MOVEは補正量，Bはq_{n-2}とq_{n-1}の値，INDEXとSCALEはスケーリングに関する情報である。その下の2つの数値は，この状態で$x^2+px+q=0.0$を解いた時の根である。下の方の数値と解X(1)は同じ値になっていることに注目していただきたい。

次数を1つあげた方程式を

$$\varphi(x) = x^{n+1} + a_1 x^n + \cdots + a_n x = 0.0$$

とすると，$\varphi(x)$の根は，多重根を含め(n+1)個であるが，そのうち1つは必ず0.0である。このことにより，B-H法の2次因数を(x^2+px)とおき，$\varphi(x)$を整除する。しかし，$\varphi(x) = xP(x)$であるため，(x^2+px)で$\varphi(x)$を整除することは，$(x+p)$で$P(x)$を整除することに等しい。つまり，$\varphi(x)$に対するB-H法は，$P(x)=0.0$に対する1変数Newton法に等しい。一見，次数を上

```
N + A(1)*X**(N-1) + ... + A(N) = 0.0

 10


  A(   1 ) = -0.20000000000000000D 05
  A(   2 ) =  0.99999999999999990D 08        ◀係数
  A(   3 ) = -0.21400000000000000D 09
  A(   4 ) =  0.22600000000000000D 08
  A(   5 ) = -0.73200000000000000D 06
  A(   6 ) =  0.34100000000000000D 04
  A(   7 ) =  0.12400000000000000D 03
  A(   8 ) = -0.35300000000000000D-04
  A(   9 ) =  0.24400000000000000D-11
  A(  10 ) =  0.11500000000000000D-19



CONVERGENCE:
THE  1-TH ROOT HAS NOT BEEN DEFINED    ・P,Qは,収束しなかった時の値.
AFTER 100 ITERATIONS.

THE LAST VALUE OF P, Q, EPS, B & SCALE:
P                 Q                 EPSILON      MOVE         B
0.1321757D-06 -0.6045124D-15    0.143D-18    0.112D-07  -0.175D-04    0.895D-14
  INDEX    SCALE                ◀収束判定値    ◀移動(補正)量                  あまり
      0     0.10000E 01

ROOTS OF THE EQUATION EXPRESSED IN THE FORM OF    X*X + P*X + Q = 0.0 :
  0.13660112515682420-06 ,  0.0                    *I )
 -0.44253841173487190-08 ,  0.0                    *I )
X²+PX+Q=0.0を解いた時の解
SUPPORTING PROGRAM ENTERED.
SYSTEM SET UP A DUMMY ROOT GIVEN BY ZERO.
EXECUTION CONTINUED.



TS OBTAINED BY BAIRSTOW-HITCHCOCK METHOD:

          X( 1) = ( -0.44253841173487190-08 ,  0.0                    *I )

          X( 2) = (  0.14455055802946440-06 ,  0.78601798546261890-08 *I )

          X( 3) = (  0.14455055802946440-06 , -0.78601798546261890-08 *I )

          X( 4) = (  0.34662721774583830-01 ,  0.0                    *I )

          X( 5) = ( -0.96807344859870650-02 ,  0.0                    *I )

          X( 6) = (  0.42275387260460390-01 ,  0.57214346616622180-02 *I )

          X( 7) = (  0.42275387260460390-01 , -0.57214346616622180-02 *I )

          X( 8) = (  0.9852623710744860 04 ,  0.0                    *I )

          X( 9) = (  0.2031338311967048D 01 ,  0.0                    *I )

          X(10) = (  0.1014523575756706D 05 ,  0.0                    *I )
```

げることは，感覚的にも，精度の点において不利のようであるが，係数そのものを書き替えるわけではないので，もとの精度を維持でき，しかも収束性を高めるという点において，非常に有効な手段であることが，種々の実験によって確かめられた。

・多重根に対するB-H法

多重根に対して，B-H法は必ずしも精度のよい解を与えるものではない。と言うより，特別な考慮をしてやらなければ，14桁，15桁といった高精度は，とても保証できない。下に示す数値は　$x^6-12x^5+63x^4-190x^3+358x^2-400x+200=0.0$ に対するB-H法による解である。真の解は，$(2, 1\pm 2i, 3\pm i)$ で2が2重根になっている。この2根はX(1)，X(2) に相当する。実用上は，この程度の精度で問題は生じないであろう。2重根に対しては，収束判定条件をかなり厳しくしても反復回数に制限を設けなければ収束するようであるし，その時得られる値は得心のゆくものであるが，今度は，B-H法における重根判定に問題が残るところである。出力2に示す数値は、$x^7-14x^6+87x^5-316x^4+738x^3-1116x^2+1000x-400=0.0$ に対するB-Hである。真の解は，$(2, 1\pm 2i, 3\pm i)$ で2が3重根になっている。これに対応するものはX(1)，X(2)，X(3) であるが，精度が2重根に対して落ちている上に，収束改善策を施さな

```
TS OBTAINED BY BAIRSTOW-HITCHCOCK METHOD:
          X( 1) = (  0.20000000516191390 01 ,  0.0                          *I )
          X( 2) = (  0.19999999483808660 01 ,  0.0                          *I )
          X( 3) = (  0.10000000000000000 01 ,  0.20000000000000000 01 *I )
          X( 4) = (  0.10000000000000000 01 , -0.20000000000000000 01 *I )
          X( 5) = (  0.29999999999999960 01 ,  0.99999999999999820 00 *I )
          X( 6) = (  0.29999999999999960 01 , -0.99999999999999820 00 *I )
```

▲出力1. $x^6-12x^5+63x^4-190x^3+358x^2-400x+200=0.0$

のB-H法による解。真の解は、$(2, 1\pm 2i, 3\pm i)$ で X(1), X(2) が"重根2に対応する。

▼出力2. $x^7-14x^6+87x^5-316x^4+738x^3-1116x^2+1000x-400=0.0$

のB-H法による解。真の解は $(2, 2, 2, 1\pm 2i, 3\pm i)$ で、X(1), X(2), X(3) が"3重根2に対応する。収束改善策を施さなければ収束しない。

```
TS OBTAINED BY BAIRSTOW-HITCHCOCK METHOD:
          X( 1) = (  0.19999828936170200 01 ,  0.0                          *I )
          X( 2) = (  0.20000085531914730 01 ,  0.14815291705708420-04 *I )
          X( 3) = (  0.20000085531914730 01 , -0.14815291705708420-04 *I )
          X( 4) = (  0.10000000000000020 01 ,  0.20000000000000020 01 *I )
          X( 5) = (  0.10000000000000020 01 , -0.20000000000000020 01 *I )
          X( 6) = (  0.30000000000000180 01 ,  0.10000000000000000 01 *I )
          X( 7) = (  0.30000000000000180 01 , -0.10000000000000000 01 *I )
```

▼出力3 (出力1)と同じ問題を複素Newton法(MATRP)で補正して得られた解

```
TS OBTAINED BY MATRP :
          X( 1) = (  0.19999999999999940 01 ,  0.0                          *I )
          X( 2) = (  0.19999999999999940 01 ,  0.0                          *I )
          X( 3) = (  0.10000000000000000 01 ,  0.20000000000000000+01 *I )
          X( 4) = (  0.10000000000000000 01 , -0.20000000000000000+01 *I )
          X( 5) = (  0.29999999999999970 01 ,  0.99999999999999640+00 *I )
          X( 6) = (  0.29999999999999970 01 , -0.99999999999999640+00 *I )
```

ければ収束しない。別の見方をすれば，前述した収束改善策は，多重根を持つ問題に対しては，多重根のうち一つを分離させる効果をもつと言える。B-H法において，ΔpとΔqは

$$\Delta p = (b_{n-1} \times C_{n-2} - b_n \times C_{n-3}) / \Delta$$

$$\Delta q = (b_n \times C_{n-2} - b_{n-1}(C_{n-1} - b_{n-1})) / \Delta$$

$$\Delta = C_{n-2}^2 - C_{n-1} \times C_{n-3}$$

によって決定されるが，与えられた方程式が3重根または，それ以上の重根を持つとき，$\Delta = 0.0$となってしまう。2重根の場合も，うまく2重根同士をペアに組めなかったならば，$\Delta = 0.0$となる。原理的には解が求まらないはずである。しかし，幸いにも，我々は今までそのような事態に出会ったことはない。B-H法で求まった解がかなりの誤差をもっていても，その解が得られた反復の列を見てみると，$\max(|\Delta p|, |\Delta q|)$がゼロになっていたりする。このあたり計算機による多項式の計算の限界であるのかもしれない。しかし，B-H法にせよ，DKA法にせよ，その計算の限界によって，ある程度救われている面を持っていることは否めない事実であろう。

3.2 Durand-Kerner-Aberth法（DKA法）

DKA法は，適当な初期値$z_1^{(0)}, \cdots, z_n^{(0)}$から出発し，

$$z_i^{(\nu+1)} = z_i^{(\nu)} - \frac{P(z_i^{(\nu)})}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} (z_i^{(\nu)} - z_j^{(\nu)})} \qquad (i = 1, \cdots, n) \quad (\nu \geq 0)$$

による反復を行ない，$\nu \to \infty$ のとき，$z_i^{(\nu)} \to \alpha_i$ $(i=1,\cdots,n)$

$P(\alpha_i)=0.0$ とする方法である。DKA法は，大域収束性があり，他の方法と異なり，誤差が累積しないという極めてすぐれた特徴をもつ。この方法は，n元連立非線型方程式を解くNewton法であり，局所的2次収束する。しかし，次数の高いものに対しては，最初のうち収束が極端に遅いという性質を併せもつ。ROOTS-PACKでは，誤差が累積しない，局所2次収束という点で，精度の改善に用いている。

3.3 複素Newton法

多重根に対してB-H法による解が高い精度を保証できないことは前述した。DKA法において，$P(x)=0.0$ の根に多重根があっても，近似根は相異なるため，重根を持つ方程式に対しても収束することが確かめられている。実用上は，まったく支障はないが，高い精度はDKA法でも保証できない。ここで述べるNewton法はROOTS-PACKで用いているもので，多重根に対しても有効なNewton法である。$P(x)$ を α 中心にTaylor展開すると，

$$P(x) = P(\alpha) + \sum_{i=1} \frac{P^{(i)}(\alpha)}{i!} (x-\alpha)^i$$

$P(x)=0.0$ において，$x=\alpha$ がm重根であるとすると，

$$P(\alpha) = P'(\alpha) = \cdots = P^{(m-1)}(\alpha) = 0.0$$

となり，$x=\alpha$ の近傍で

$$P(x) = \frac{P^{(m)}(\alpha)}{m!}(x-\alpha)^m + O((x-\alpha)^{m+1})$$

このことから，$x-\alpha \fallingdotseq (P(x))^{\frac{1}{m}}$。つまり，1変数Newton法をm重根に適用した場合，根の精度は，残差の精度の$\frac{1}{m}$しか得ることができない。方程式 $P(x)=0.0$ が2重根αをもつ時，$P(x)$の導関数$P'(x)$による $P'(x)=0.0$という方程式はαを単根にもつ。一般に $P(x)=0.0$ がm重根αをもつ時 $P^{(m-1)}(x)=0.0$ はαを単根にもつ。ROOTS-PACK で用いたNewton法は，方程式$P(x)=0.0$が，m重根を持つとき

$$x_{i+1} = x_i - \frac{P^{(m-1)}(x_i)}{P^{(m)}(x_i)}$$

によるNewton法を行なうものである。第k次導関数の計算は組立除法によっている。すなわち，$P(x)$の原点を移動し，

$$P(x) = (x-\alpha)^n + r_1(x-\alpha)^{n-1} + \cdots + r_n$$

とした時　$r_k = \frac{P^{(n-k)}(\alpha)}{(n-k)!}$ となる。

よって　$x_{i+1} = x_i - \frac{r_{n+1-m}}{r_{n-m} \times m}$

とすればよい。多重根の判定は問題の残るところであるが，今のところ

$$\left|\frac{P^{(m-1)}(x_i)}{P^{(m)}(x_i)}\right| \geq |x_i| \times \rho \qquad (\rho = 10^{-8})$$

によっている。

この条件を満足した時，導関数を1つあげることにしているが，この点に関しては，これからの考察が必要となろう。

出力3は $x^6-12x^5+63x^4-190x^3+358x^2-400x+200=0.0$
をB-H法で求めNewton法で修正した解である。前にも書いたが真の解は（2,1±2i,3±i）で2が2重根である。出力では，X(1)とX(2)がそれに対応している。

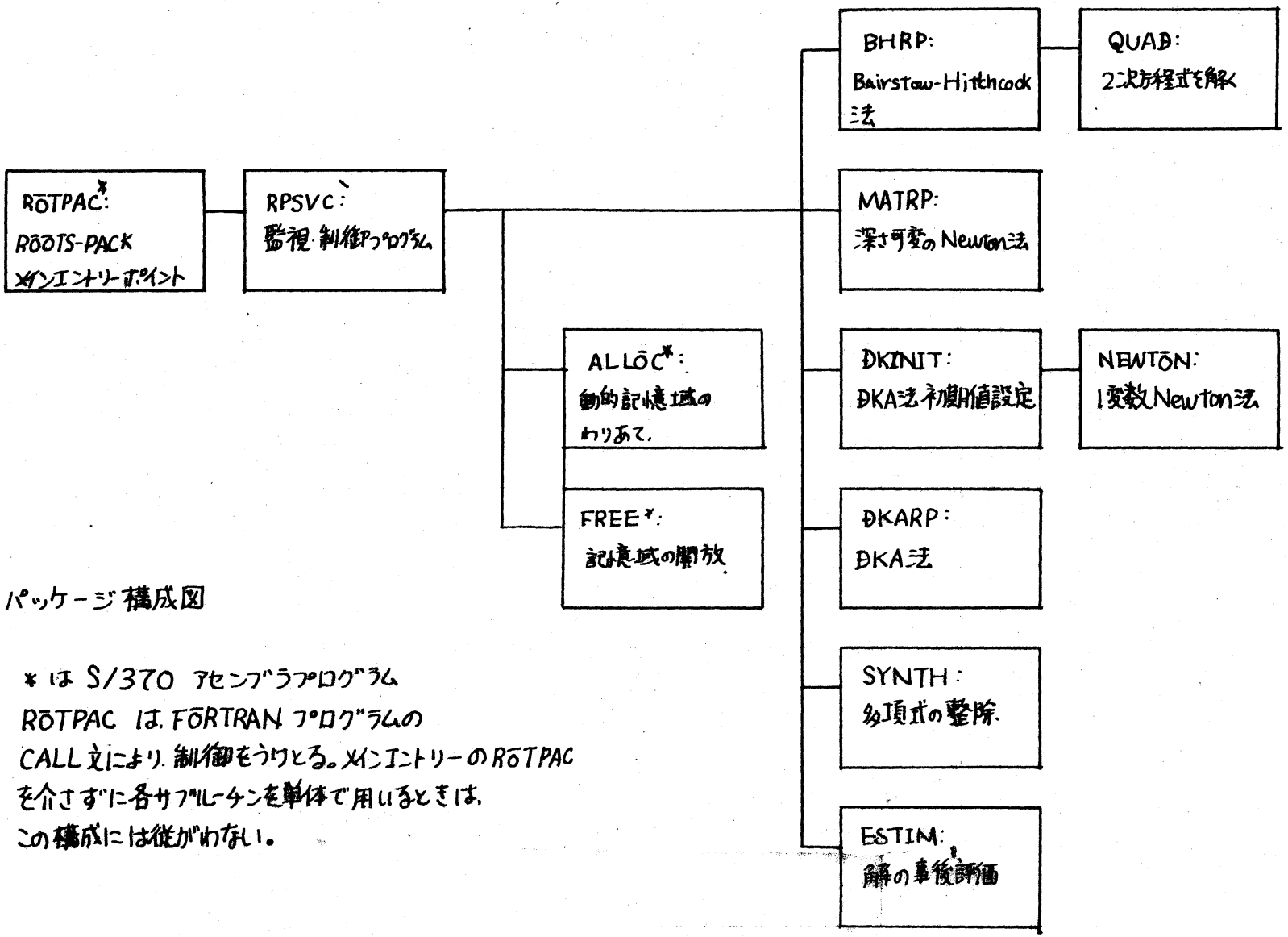
4.誤差の処理

ROOTS-PACKの中心となっている解法はB-H法であるが，B-H法等の減次操作を伴なうもので気になるのは，次数低下のくり返しによる誤差の累積の危険性をもつということである。誤差の混入，伝播，拡大について考慮するならば，絶対値の小さいものから求めてやれば，桁落ちの危険も少なくなり，誤差の拡大も最小に抑えられる。ROOTS-PACKでは解の事後評価を行ない，必要であらば精度の改善を行なうため，それ程気にする必要もないが，できるならば，絶対値の最も小さいものに収束するような値をB-H法の初期値として与えることが望ましい。数値実験では，ZERO-DIV. エラーの生じる以外は，p,qの初期値として0.0を用いたが，B-H法に関する限り，この値は初期値の設定という問題を解決しているように思われる。と言うのは，初期値として0.0を与えた場合，ほとんどの問題で原点に近い2根から組みあわされてゆくことが実験によりわかったからである。減次操作による精度の低下は，桁落ち等の他に，解そのもののもつ誤差によっても生じる。前

述したようにB-H法は，3重根に対しては収束しにくく，得られた解の精度も悪い。精度の悪い近似解で減次すれば，以下の解に対する影響は極めて大きいものとなるであろう。しかし，今までの実験では，減次操作を繰り返す度に，解の精度が次第に低下してくるような現象に出会ったことはない。精度の悪い近似解が得られた後の2,3のものは影響をうけるが，再び精度をもちなおすようである。精度の悪い近似解が出現したならば，その後の2,3の解で精度のくずれを吸収しているような現象がおこるのである。

5. RŌŌTS-PACKの構成

RŌŌTS-PACKのパッケージ構成図を図1に示す。RŌŌTS-PACKはFŌRTRANプログラムのCALL文によって制御権を受けとると，メインエントリーのRŌTPACはdummy arrayのポインタの初期設定を行なった後，RŌŌTS-PACKの監視コントロールを行なうRPSVCへさらに制御をわたす。RPSVC以下のすべてのサブルーチンの情報は全てRPSVCへ集められ，制御される。RPSVCは初めに仮想主記憶の制御を行ない，必要な長さだけの記憶域を確保する。解法は，B-H法，DKA法，Newton法を必要に応じて使いわけ，精度の改善をはかる必要があれば，それを行なう。与えられたすべての方程式は，まずB-H法へ通され，収束しなかった場合や，精度が悪い場合には，しかるべき



・パッケージ構成図

*は S/370 アセンブラプログラム
ROTPAC は FORTRAN プログラムの
CALL文により制御をうけとる。メインエントリーのROTPAC
を介さずに各サブルーチンを単体で用いるときは、
この構成には従がわない。

処置がとられる。収束しなかった問題に対して，収束改善策を施してもなおかつ収束しなかった問題に出会ったことはないが，万一に備え，Aberthの方法によって初期値を設定し，DKA法が用いられるようになっている。

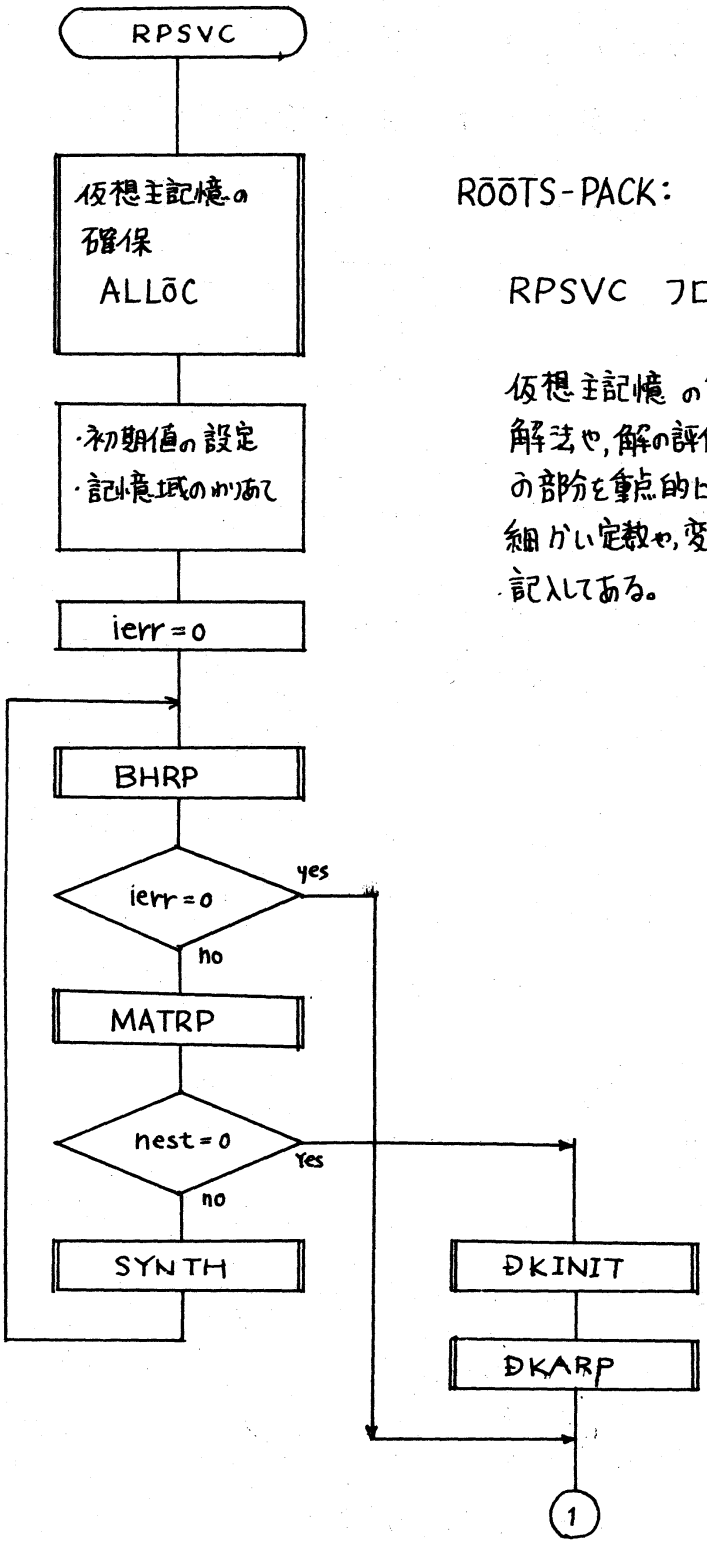
・プログラム概略

ROTPAC (n,A,X,R)　　ROOTS-PACK のメインエントリー。次の RPSVC で仮想主記憶の制御を行なうため，dummy array のポインタの初期化をする。つまり，FORTRAN プログラム内で割りあてられた配列を使うため，ポインタを'1'にして，パラメータ・リストを書き替える作業をしている。ここでは，(array, n, A, X, R) というパラメータ・リストを作成し，次の RPSVC へ制御を渡す。

RPSVC (ARRAY, n, A, X, R)　　ROOTS-PACK 監視制御プログラム。

```
C ::::: ROOTS SYSTEM SUBROUTINE PACKAGE ::::::::::::::::
C ::::: ROOTS-PACK SUPERVISOR & CONTROLLER ::::::::::::::
      SUBROUTINE  RPSVC(ARRAY,N,A,X,R)
         COMPLEX*16  X(N),CDUMMY
         REAL*8  A(N),R(N)
         INTEGER*4  ADDR16,ADDR1,ADDR2,BOUND1,BOUND2
         LOGICAL*1  ARRAY(1),CONVRP,DKASUP,ALLDEF
```

必要な配列の長さを LENGTH バイトであるとすると，RPSVC は ALLOC を呼ぶ (つまり CALL ALLOC (LENGTH, ADDR16)) ことにより，主記憶内 ADDR16 番地から LENGTH バイトの記憶域を確保し，その制御範囲に入れるのである。ただし，dummy array の ARRAY は，



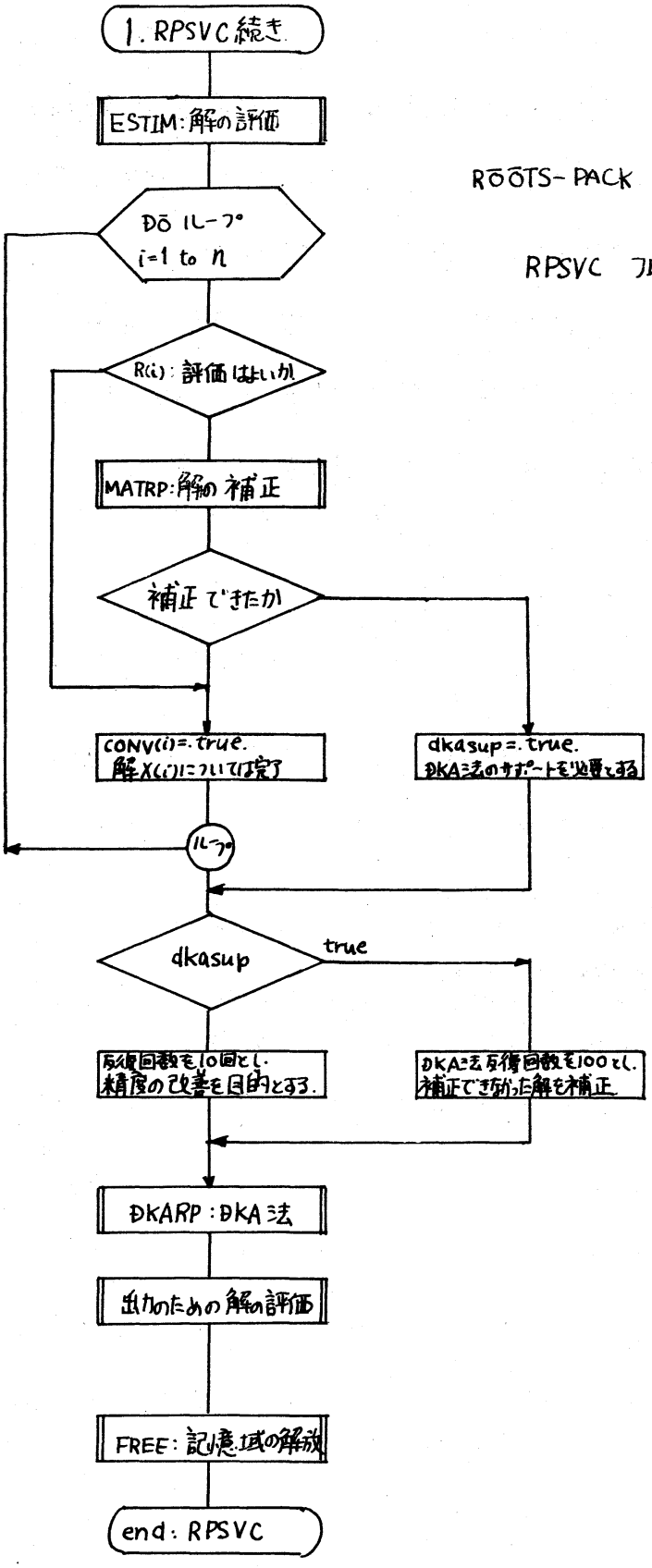
ROOTS-PACK:

RPSVC フローチャート (1)

仮想主記憶の制御以外の部分,
解法や,解の評価,精度の改良のアルゴリズム
の部分を概略的に示した。
細かい定数や,変数は全て省いて
記入してある。

ROOTS-PACK

RPSVC フローチャート(2)



RPSVC内では1バイトの論理型であると宣言してあるため，このプログラム内では，割りあてた記憶を実数型としては使用できない。実数型の配列として使用するには，さらにサブルーチンを呼ばなくてはならない。RPSVCでは次のようなサブルーチンを用いている。このサブルーチンは，標に用意してある，A,Xの他に，倍精度複素型のZ，論理型のCONVを新たに用意しなければ利用することはできない。

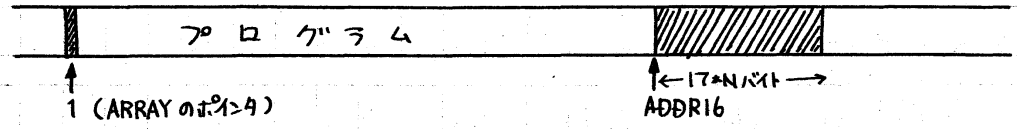
```
C ::::: DURAND-KERNER-ABERTH METHOD FOR SOLVING ALGEBRAIC EQUATIONS :::
      SUBROUTINE  DKARP(N,A,X,Z,CONV,ITRLMT)
         COMPLEX*16  X(N),Z(N)
         COMPLEX*16  U,V,CD,DX
         REAL*8  A(N)
         REAL*8  THRESH,ROOF,EPS,DUMMY
         REAL*8  DREAL,DIMAG
         LOGICAL*1  CONV(N),ALLDEF
```

N(方程式の次数)が例えば10であったとすると，RPSVC内でDKARPを用いるには次のようにすればよい。

```
LENGH = 16*N + N
CALL ALLOC(LENGTH,ADDR16)
ADDR1 = ADDR16 + 16*N
CALL DKARP (N,A,X,ARRAY(ADDR16),ARRAY(ADDR1),100)
CALL FREE (LENGTH,ADDR16)
```

実引数と仮引数の型が異なっているが，ここでは単にアドレスのうけわたしをしているだけで，エラーは起きない。上の例は，ARRAYという配列のADDR16番地から16*Nバイトを乙用に，ADDR1番地からNバイトをCONV用に割りあてた例である。ADDR16の内容

は知ることができない。主記憶内は下のように分割



されている。ARRAY(1)はプログラムの先頭に1バイトだけ確保されているが，ARRAY(2)は恐らくプログラム本体とオーバーラップしている。ADDR16の値はオーバーラップしている配列が配列として使用できる最初の番地なのである。

ALLOC (length, addr)　動的記憶域割あてルーチン。仮想主記憶の制御を行ない，lengthバイトの記憶域を確保する。

FREE (length, addr)　動的記憶域開放ルーチン。仮想主記憶の制御を行ない，ALLOCで割りあてたaddr番地から，長さlengthバイトの記憶域を開放する。

BHRP (n, A, X, ierr)　単体で使用する時はierr=0としてから，CALLしなければならない。出力時，通常はierr=0となって制御が返されるが，エラー時はierr=jとなって出力される。この時X(j)以降の解は不定である。

MATRP (n, A, x, Z, nest)　複素Newton法サブルーチン。単体で利用する場合，ユーザーは，xに初期値を与えておかなければならない。Zは計算用の配列。nestには根の多重度が入る。反復が収束しなかった場合，

nest=0 とセットされて出力される。

DKARP (n,A,X,Z,CONV,iters) DKA 法サブルーチン。単体で使用する場合は，CALL する前に CONV(i)=.false. (i=1,…,n) と初期値を与えておかなければならない。すべての解を得られた時は CONV(i)=.true. となって制御が返される。もし，CONV(i)=.false. ならば，X(i) は不定である。iters はユーザーが指定する反復回数。

DKAINIT (n,A,X) Aberthの方法による DKA 法の初期値設定ルーチン。配列 A の内容は出力時も破壊されない。

SYNTH (n,A,α,iroot) α による多項式の整除を行なう。α が虚数の時は，自動的に共役数を組みあわせて，2次式による整除を行なう。iroot は整除した式の次数，すなわち，2次式による整除であれば iroot=2 である。n は整除された後の式の次数が入って出力される。

ESTIM (n,A,X,R) Smithの定理により，得られた解を事後評価するルーチン。R(i) は X(i) の評価値。

QUAD (p,q,y1,y2) 2次方程式 $x^2+px+q=0.0$ を解くサブルーチン。絶対値の小さい解が y1 に入る。

NEWTON (n,A,α,iters) 実 Newton 法サブルーチン。単体で用いる場合は，ユーザーは α の初期値を設定しておかな

ければならない。itersは解を得るのに必要とした反復数が入る。収束しなかった場合は，iters=0とセットされて出力される。

＊変数　n: 方程式の次数（integer＊4）

A: 係数を含む配列（real＊8）

X: 解が入る配列（complex＊16）

R: 解の評価値が入る配列（real＊8）

ARRAY: dummy array（logical＊1）

Z: 計算用配列（complex＊16）

CONV: 収束判定用配列（logical＊1）

x: MATRP, SYNTH では（complex＊16）

NEWTON では（real＊8）

y1, y2:（complex＊16）

・プログラム

以下に，ROOTS-PACK のプログラムのうち，一部を付記しておく。言語は，FORTRAN Ⅳ（G or G1）と IBM System/370 アセンブラ言語である。GETMAIN, FREEMAIN は仮想主記憶の制御に関するマクロ命令である。

```
FILE: ROOTSPK  VMASM    A   VM/370 VERSION 05 PLC.12 LTR.512 WASEDA UNIV.

*************************************************************************
*                                                                       *
*     ROOTS SYSTEM SUBTOUTINE PACKAGE SYSTEM/370 ASSEMBLER PROGRAMS     *
*                                                                       *
*************************************************************************
* MACRO DEFINITION
          MACRO
          REGEQU
R0        EQU   0
R1        EQU   1
R2        EQU   2
R3        EQU   3
R4        EQU   4
R5        EQU   5
R6        EQU   6
R7        EQU   7
R8        EQU   8
R9        EQU   9
R10       EQU   10
R11       EQU   11
R12       EQU   12
R13       EQU   13
R14       EQU   14
R15       EQU   15
          MEND
* SAVE REGISTERS & SET R12 AS BASE REGISTER
          MACRO
&LABEL    SAVEREG  &AREA
          STM   14,12,12(13)
          BALR  12,0
          USING *,12
          ST    13,&AREA+4
          LR    15,13
          LA    13,&AREA
          ST    13,8(15)
          MEND
* RESTORE REGISTERS & RETURN CONTROL TO CALLER
          MACRO
&LABEL    RETREG  &AREA
          L     13,&AREA+4
          LM    14,12,12(13)
          BR    14
          MEND
*
* CONTROL SECTION BEGINS
*
* USAGE: ROTPAC(N,A,X,R)
ROTPAC    CSECT
          EXTRN RPSVC
          REGEQU
          SAVEREG  SAVEAREA
* GENERATE NEW PARM-LIST
          MVC   NAXR(16),0(R1)          *GENERATE PARMLIST
          LA    R1,PARMLIST             *R1 = ADDR OF PARMLIST
          L     R15,=A(RPSVC)           *LOAD ADDR OF 'RPSVC'
```

FILE: ROOTSPK VMASM   A   VM/370 VERSION 05 PLC.12 LTR.512 WASEDA UNIV.

```
         BALR  R14,R15                    *SUBROUTINE CALL
* RESTORE REGISTERS
         RETREG  SAVEAREA
         LTORG
* SAVE AREA
SAVEAREA DS    18F
* PARAMETER LIST
PARMLIST DS    0F              *PARAMETER LIST
ARRAY    DC    F'1'            *SET ADDR OF DUMMY ARRAY
NAXR     DS    4F              *REAL PARMLIST
*
         END
*
* VIRTUAL STORAGE CONTROLER
* USAGE: ALLOC ( LENGTH, ADDR )
ALLOC    CSECT
* SAVE REGISTERS
         SAVE  (14,12)
         BALR  2,0
         USING *,2
* GET VIRTUAL STORAGE
         LM    3,4,0(1)          *LOAD ADDR
         L     3,0(3)            *R3 = LENGTH
         GETMAIN R,LV=(3)        *GET VIRTUAL STORAGE
         ST    1,0(4)            *STORE ADDR
* RESTORE REGISTERS
         RETURN (14,12)
         END
*
* USAGE: FREE ( LENGTH, ADDR )
FREE     CSECT
* SAVE REGISTERS
         SAVE  (14,12)
         BALR  2,0
         USING *,2
* FREE VIRTUAL STORAGE
         LM    3,4,0(1)          *LOAD ADDRS OF PARAMETERS
         L     3,0(3)            *R3 = LENGTH
         L     4,0(4)            *R4 = ADDR
         FREEMAIN R,LV=(3),A=(4) *FREE VIRTUAL STORAGE
* RESTORE REGISTERS
         RETURN (14,12)
         END
*
* GET REAL PART OF X DECRARED AS COMPLEX*16
DREAL    CSECT
         L     1,0(1)
         LD    0,0(1)
         BR    14
         END
*
* GET IMAGINAL PART OF X DECRARED AS COMPLEX*16
DIMAG    CSECT
         L     1,0(1)
         LD    0,8(1)
```

FILE: ROOTSPK VMASM A VM/370 VERSION 05 PLC.12 LTR.512 WASEDA UNIV.

```
         BR    14
         END
```

26

FILE: BHRP VMFORT A VM/370 VERSION 05 PLC.12 LTR.512 WASEDA UNIV.

```
C ::::: ROOTS SYSTEM SUBROUTINE PACKAGE ::::::::::::::::::::::::::::::::
C ::::: BAIRSTOW-HITCHCOCK METHOD ::::::::::::::::::::::::::::::::::::::
      SUBROUTINE  BHRP(N,A,X,IERR)
         COMPLEX*16 X(N)
         COMPLEX*16 Y1,Y2,CD,U,V
         REAL*8 A(N)
         REAL*8 P,Q,D,DP,DQ,PB,QB,PF,QF,B1,B2,B3,C1,C2,C3
         REAL*8 EPS,THRESH,BASE,BASIS,DUMMY
         REAL*8 DABS,DMAX1,CDABS
         LOGICAL*1 EFFECT,LAST,ZRDIV,SUPPRT
C ::::: EXECUTION BEGINS :::::
      IF ( N .LE. 0 )  RETURN
C ::::: INITIALIZE :::::
      LAST = .FALSE.
      BASE = 1.0D-12
      COUNT = 0
      ITRLMT = 100
      M = N
      ID = 1
      SUPPRT = IERR .EQ. 0
      IF ( .NOT. SUPPRT )  ID = IERR
      IERR = 0
      G = 2.0 / FLOAT( N )
      PF = 1.0D0
      QF = 1.0D0
      IF ( A(1) .NE. 0.0D0 )  PF = A(1) * G
      IF ( A(N) .NE. 0.0D0 )  QF = DABS( A(N) ) ** G
C ::::: BRANCH :::::
  250 IF ( M - 2 )  580, 470, 300
C ::::: DEFINE P & Q :::::
  300 EFFECT = .FALSE.
      P = 0.0D0
  320 Q = 0.0D0
      DQ = 0.0D0
      K = M - 1
C ::::: ITERATION :::::
  360 ZRDIV = .FALSE.
      BASIS = BASE
      MORE = ITRLMT + 1
      DO 420  ITER = 1, ITRLMT
         THRESH = DMAX1( DABS( P ) , DABS( Q ) ) * BASIS
  370    B2 = 0.0D0
         C2 = 0.0D0
         B3 = 1.0D0
         C3 = 1.0D0
         DO 380  I = 1, K
            B1 = B2
            C1 = C2
            B2 = B3
            C2 = C3
            B3 = A(I) - P * B2 - Q * B1
            C3 = B3 - P * C2 - Q * C1
  380    CONTINUE
         B1 = 0.0D0
         IF ( .NOT. EFFECT )  B1 = A(M)
```

```
FILE: BHRP     VMFORT   A   VM/370 VERSION 05 PLC.12 LTR.512 WASEDA UNIV.

          B1 = B1 - P * B3 - Q * B2
          D  = C2 * C2 - C1 * ( C3 -B3 )
          IF ( D .NE. 0.0D0 )  GO TO 390
C         :::: ZERO-DIVIDE CONDITION RAISED :::::
              IF ( EFFECT )  GO TO 390
              IF ( ZRDIV )  GO TO 450
              ZRDIV = .TRUE.
              P = PF
              Q = QF
              GO TO 370
  390     DP = ( B3 * C2 - B1 * C1 ) / D
          DQ = ( B1 * C2 - B3 * ( C3 - B3 ) ) / D
          EPS = DMAX1( DABS( DP ) , DABS( DQ ) )
          IF ( ITER .GT. MORE )  GO TO 500
  400     IF ( EPS .GT. THRESH )  GO TO 410
          MORE = MIN0( ITER + 5 , ITRLMT - 10 )
          PB = P
          QB = Q
          IF ( BASIS .LT. 1.0D-30 )  GO TO 500
          BASIS = BASIS * 1.0D-02
          GO TO 400
  410    P = P + DP
         Q = Q + DQ
  420 CONTINUE
C ::::: THE GREATEST ALGORITHM :::::
      CALL QUAD(P,Q,X(ID),X(ID+1))
      IF ( ( .NOT. SUPPRT ) .OR. ( EFFECT ) )  GO TO 460
      EFFECT = .TRUE.
      P = -X(ID)
      M = M + 1
      GO TO 320
C ::::: THE LAST TWO ROOTS FOUND :::::
  470 PB = A(M-1)
      QB = A(M)
      LAST = .TRUE.
C ::::: QUADRATIC EQUATION :::::
  500 CALL QUAD(PB,QB,X(ID),X(ID+1))
      IF ( .NOT. EFFECT )  GO TO 540
         X(ID) = X(ID+1)
         ID = ID - 1
  540 ID = ID + 2
      COUNT = 0
      M = M - 2
      IF ( LAST )  GO TO 590
C ::::: SYNTHETIC DIVISION :::::
      B2 = 0.0D0
      B3 = 1.0D0
      DO 570  I = 1, M
         B1 = B2
         B2 = B3
         B3 = A(I) - P * B2 - Q * B1
         A(I) = B3
  570 CONTINUE
      GO TO 250
C ::::: ONE ROOT FOUND :::::
```

```
  580 X(ID) = -A(1)
      ID = ID + 1
  590 ID = ID - 1
  700 RETURN
C ::::: ERROR EXIT :::::
  450 ID = -ID
  460 IERR = ID
      RETURN
      END
```

```
FILE: MULTRP   VMFORT   A   VM/370 VERSION 05 PLC.12 LTR.512 WASEDA UNIV.

C :::::: ROOTS SYSTEM SUBROUTINE PACKAGE ::::::::::::::::::::::::::::::::
C :::::: MATSUMUTA'S ALGORITHM: NEWTON-ITERATION FOR MULTIPLE ROOTS ::::::
      SUBROUTINE  MATRP(N,A,X,B,NEST)
         COMPLEX*16  B(N)
         COMPLEX*16  X,SAVE,DX,C,VALUE,DCMPLX
         REAL*8  A(N)
         REAL*8  THRESH,EPS,BASE
         REAL*8  ROOF,OLDEPS,HEAVEN
         REAL*8  DREAL,DIMAG
         INTEGER*4  DASH,STATUS,STHOLD,HOLD
         LOGICAL*1  FLAG,PERMIT,FIX
C :::::: INITIALIZE ::::::
      FIX = NEST .NE. 0
      IF ( .NOT. FIX )  NEST = 1
      ITRLMT = 30
      STATUS = 0
      STHOLD = 7
      SAVE = X
C :::::: ITERATION BEGINS ::::::
        DO 200 ITER = 1, ITRLMT
            HEAVEN = CDABS( X )
            ROOF = CDABS( X ) * 1.0D-08
            THRESH = CDABS( X ) * 1.0D-12
C :::::: DEFINE F(X) ::::::
            C = 1.0D0
            DO 110  I = 1, N
            C = A(I) + X * C
            B(I) = C
  110       CONTINUE
C :::::: DEFINE F'(X) ::::::
            DO 140  DASH = 1, NEST
                K = N - DASH
                    C = 1.0D0
                    DO 130  I = 1, K
                    C = B(I) + X * C
                    B(I) = C
  130               CONTINUE
  140       CONTINUE
            DX = B(K+1) / ( B(K) * DFLOAT(NEST) )
            EPS = CDABS( DX )
            IF ( ( EPS .LE. THRESH ) .AND. ( ITER .GE.2 ) )  GO TO 220
C :::::: TEST AS IF F'(X) EQUAL ZERO OR NOT ::::::
            PERMIT = ( ITER .GT. 10 ) .AND. ( STATUS .GT. STHOLD )
     &                 .AND. ( EPS .GT. ROOF ) .AND. ( .NOT. FIX )
     &                 .AND. ( EPS .LT. HEAVEN )
            IF ( .NOT. PERMIT )  GO TO 150
            STATUS = 0
            NEST = NEST + 1
  150       STATUS = STATUS + 1
            IF ( EPS .LT. HEAVEN )  GO TO 170
                STATUS = 0
                STHOLD = 10
                IF ( NEST .GE. 2 )  NEST = NEST - 1
                DX = 0.0D0
  170       X = X - DX
```

FILE: MULTRP VMFORT A VM/370 VERSION 05 PLC.12 LTR.512 WASEDA UNIV.

```
               IF (DABS(DREAL(X)).LE.THRESH) X=DCMPLX(0.0D0,DIMAG( X ))
               IF (DABS(DIMAG(X)).LE.THRESH) X=DCMPLX(DREAL( X ),0.0D0)
  200     CONTINUE
  210 NEST = 0
      X = SAVE
  220 RETURN
      END
```

6. むすび

下に示したプログラムは ROOTS-PACKの使用例である。

```
C ::::: THE ALGEBRAIC EQUATION     ::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::
      COMPLEX*16 X(52)
      REAL*8 A(52),R(52)
C ::::: EXECUTION BEGINS ::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::
   10 READ(5,1000,END=450) N,(A(I),I=1,N)
      WRITE(6,1002) N,(I,A(I),I=1,N)
C ---------------------------------------------------------------------
      CALL ROTPAC(N,A,X,R)
      WRITE(6,1006)
      WRITE(6,1007)  (I,X(I),R(I),I=1,N)
C ---------------------------------------------------------------------
      GO TO 10
  450 STOP
 1000 FORMAT(I2/(4E20.12))
 1002 FORMAT('1','ROOTS SYSTEM SUBROUTINE PACKAGE:  ( VERSION 1.0 )'
     &/       ' ','X**N + A(1)*X**(N-1) + ... + A(N) = 0.0'
     &/       ' ','N =',I3
     &/       ' '/(6X,'A(',I3,' ) =',D24.16))
 1006 FORMAT('0','ROOTS OBTAINED BY ROTPAC:')
 1007 FORMAT(('0',15X,'X(',I2,') = (',D24.16,' ,',D24.16,' *I )'
     &,       10X,'N*|P(X)/DP| =',D9.2))
      END
```

現在，ROOTS-PACKはCMSにおいて，個人用ディスクで使用している。オブジェクトで30k足らずで，個人用の割りあてちシリンダに納め，他にワークエリアが充分とれるほど小さい。今後，RPSVCの改良や，重根の判定等，多くの課題が残されているが，ROOTS-PACKが，今後のサブルーチン・パッケージのあり方に対する一つの提案となれば幸である。

・参考文献

(1) 情報処理 6月号（1977）代数方程式を解く Durand-Kerner法とAberth法　山本哲郎（p.566）

(2) 数値解析の基礎（日新出版）　篠原能材